

УДК 548.732

ТЕОРИЯ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКЦИИ НА КРИСТАЛЛЕ С ПОВЕРХНОСТНЫМ РЕЛЬЕФОМ

А.В. КАРПОВ*, Д.В. КАЗАКОВ*, К.М. ПАВЛОВ**, В.И. ПУНЕГОВ*

**Физико-математический институт Коми научного центра УрО РАН,
г. Сыктывкар*

***School of Science and Technology, University of New England, NSW 2351,
Australia*

karpov@ipm.komisc.ru

Разработана общая теория дифракции рентгеновских лучей на кристалле с поверхностной решёткой применительно к высокоразрешающей трёхкристалльной дифрактометрии. Детально исследована дифракция на трапецидальном, синусоидальном и параболическом поверхностном рельефе. Выполнен анализ решений дифракционной задачи в кинематическом приближении. Проведено численное моделирование углового распределения интенсивности рассеяния от разных профилей поверхностного рельефа.

Ключевые слова: высокоразрешающая рентгеновская дифрактометрия, кристаллический рельеф, реконструкция профиля штриха, динамическая дифракция, кинематическое приближение, карта распределения интенсивности в обратном пространстве

A.V. KARPOV, D.V. KAZAKOV, K.M. PAVLOV, V.I. PUNEGOV. THEORY OF X-RAY DIFFRACTION ON A CRYSTALL WITH SURFACE RELIEF

It is well known that surface diffraction gratings are commonly used in X-ray optics [1], opto- and nanoelectronics [2]. Surface diffraction gratings are an optical component with a periodic structure formed on crystal surface. Thin 0.2 μm surface gratings with period of 10-20 μm were for the first time studied by Aristov et al. [3,4] on a triple-axis diffractometer. Results of X-ray diffraction on InP and GaAs crystals with significantly shorter surface relief period were reported in papers [5–7]. The purpose of the current paper is to provide further development of the coplanar X-ray diffraction theory on surface diffraction gratings. The problem is formulated in general within the framework of two-wave dynamic X-ray diffraction. Stroke profile can be specified in any shape. Since the period and the thickness of the surface relief do not exceed 1 μm , we can study it using the kinematic approximation. New stroke profile models for specific surface reliefs are proposed. These models were used to solve the X-ray diffraction problem analytically in the kinematic approximation. Boundaries of applicability for every solution were indicated. Those solutions may be used to reconstruct profile models from experimental data of high-resolution X-ray diffraction. Results of the current work are applicable to the X-ray and neutron optic studies.

Keywords: high-resolution X-ray diffractometry, crystal relief, reconstruction of the grating line shape, dynamic diffraction, kinematic approximation, reciprocal space mapping

Введение

Поверхностные дифракционные решетки используются в рентгеновской оптике [1], опто- и наноэлектронике [2]. Первые экспериментальные работы по исследованию тонкого 0,2 мкм поверхностного рельефа кристаллического кремния с периодом 10–20 мкм были проведены Аристовым и др. [3, 4] с использованием трёхкристалльного дифрактометра. Результаты дифракции на кристаллическом рельефе InP и GaAs с существенно мень-

шим периодом представлены в работах [5–7]. Отметим, что рельеф поверхности InP имел синусоидальный вид [5], в то время как поверхность GaAs представляла латеральную поверхностную решётку с треугольным и прямоугольным сечением штриха [6]. В работе [7] трапецидальный кристаллический рельеф GaAs с микронным периодом исследован методом трёхосевой дифракции. Теория рентгеновской дифракции на периодическом рельефе в рамках двухкристалльной дифрактометрии рассмотрена в работе [8]. Следует отметить, что методами

рассеяния рентгеновских лучей исследуются не только кристаллические структуры, но и поверхностный рельеф тонких полимерных плёнок [9]. Настоящая работа посвящена развитию общей теории дифракции рентгеновских лучей на поверхностном кристаллическом рельефе.

Рассмотрим дифракцию рентгеновских лучей на толстом кристалле с поверхностным рельефом применительно к трехосевой дифрактометрии (рис. 1). Пусть Λ – период, l_x – ширина штриха, l_z – высота рельефа и L_z – толщина кристалла без рельефа (толщина подложки). Плоская рентгеновская волна падает на кристалл под скольльзящим углом θ_0 , отражённая волна регистрируется под углом θ_h . В обратном пространстве угловому положению (θ_0, θ_h) соответствует вектор $\mathbf{q} = \mathbf{k}_h - \mathbf{k}_0 - \mathbf{h}$ (рис. 1), при этом проекции вектора в плоскости дифракции связаны с углами как $q_x = k(\cos\theta_h - \cos\theta_0) - h\sin\phi$ и $q_z = k(\sin\theta_h + \sin\theta_0) - h\cos\phi$, где $k = 2\pi/\lambda$, λ – длина волны рентгеновского излучения, $h = 2\pi/d$ – модуль вектора обратной решётки, ϕ – угол наклона отражающих атомных плоскостей к оси x .

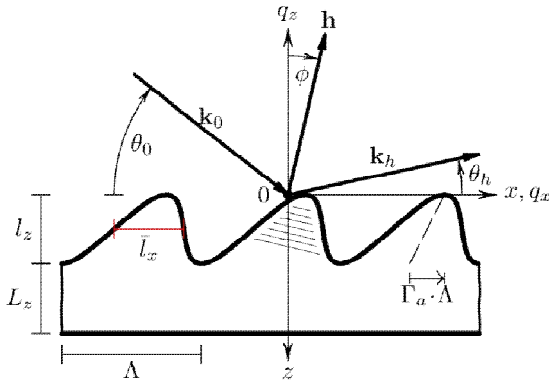


Рис. 1. Схематическое изображение дифракции на поверхностном рельефе, Λ – период рельефа, l_x – средняя ширина штриха, l_z – высота рельефа, L_z – толщина подложки.

Fig. 1. Schematic representation of diffraction on the surface relief, Λ – period of relief, l_x – average stroke width, l_z – the height of relief, L_z – the thickness of the substrate.

1. Динамическая дифракция

Дифракция рентгеновских лучей на кристалле с поверхностным рельефом описывается системой связанных уравнений [10]:

$$\left\{ \begin{aligned} (\cot(\theta_B + \phi) \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z}) E_0 &= ia_0 U E_0 + ia_{\bar{h}} U E_h, \\ (\cot(\theta_B - \phi) \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial z}) E_h &= ia_h U E_0 + i(a_{\bar{0}} U + \eta) E_h, \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

где E_0 и E_h – амплитуды проходящей и дифрагированной волны как функции от координат (x, z) , $U = U(x, z)$ – функция, описывающая профиль кристаллического рельефа, $\gamma_{0,h} = \sin(\theta_B \pm \phi)$ – направляющие синусы, $a_{0,\bar{0}} = k\chi_0/(2\gamma_{0,h})$, $a_{\bar{h},h} = k\chi_{\bar{h},h}/(2\gamma_{0,h})$, $\chi_{0,\bar{h},h}$ – Фурье коэффициенты рентгеновской поляризуемости, $\eta = k \sin(2\theta_B) \omega/\gamma_h = q_x \cot(\theta_B - \phi) + q_z$, θ_B – угол Брэгга, $\omega = \theta_0 - \theta_B$ – отклонение падающих рентгеновских лучей от точного угла Брэгга. Выполним Фурье преобразование амплитуд рентгеновских волн в (1):

$$\tilde{E}_{0,h}(\xi, z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-i\xi x} E_{0,h}(x, z). \quad (2)$$

Рассматриваемая проблема существенно упрощается в, так называемом, одномодовом режиме [11]. В рамках этого приближения не учитывается многоволновое взаимодействие рентгеновских полей соседних сателлитов, а падающая волна эффективно возбуждает только один дифракционный порядок. При этом предполагается выполнение условия $\bar{l}_x \Delta\theta \ll d$, где \bar{l}_x – средняя ширина штриха, $\Delta\theta$ – ширина брэгговского пика кривой отражения кристалла, d – межплоскостное расстояние. В результате получаем следующие укороченные уравнения в одномодовом режиме:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \tilde{E}_0(0, z)}{\partial z} &= ia_0 U_0(z) \tilde{E}_0(0, z) \\ &\quad + ia_{\bar{h}} U_{-m}(z) \tilde{E}_h(k_{\Lambda} m, z), \\ \frac{\partial \tilde{E}_h(k_{\Lambda} m, z)}{\partial z} &= -ia_h U_m(z) \tilde{E}_0(0, z) \\ &\quad - i(a_{\bar{0}} U_0(z) + \eta - k_{\Lambda} m \cot(\theta_B - \phi)) \tilde{E}_h(k_{\Lambda} m, z). \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

Здесь m – номер дифракционного порядка, $k_{\Lambda} = 2\pi/\Lambda$.

Ширина штриха на глубине z задаётся функцией $l_x(z)$. Удобно пользоваться безразмерными величинами, поэтому определим функцию $\Gamma(\zeta) = l_x(z)/\Lambda$ относительно от безразмерной координаты $\zeta = z/L_z$. Периодическую функцию профиля рельефа $U(x, z)$ представим в виде ряда Фурье, коэффициенты которого равны:

$$U_m(z) = \frac{\sin(\pi m \Gamma(\zeta))}{\pi m} e^{i\pi m \Gamma_a (2\zeta - 1)}. \quad (4)$$

Коэффициент линейной асимметрии Γ_a в (4) позволяет задавать несимметричный профиль штриха (рис. 1). Если $\Gamma_a > 0$, то форма штриха наклонена по направлению к падающему пучку, если $\Gamma_a < 0$, то против этого направления.

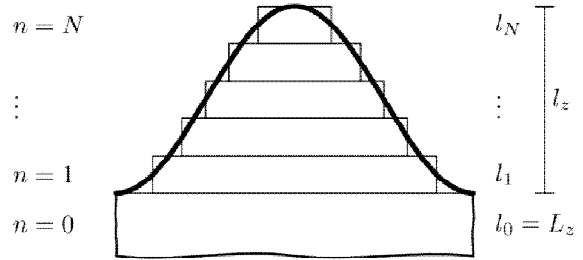


Рис. 2. Схематическое изображение разбиения профиля штриха на элементарные слои в рамках решения задачи динамической дифракции.

Fig. 2. Schematic representation of the partitioning of the profile bar on the elementary layers in the framework of solving the problem of dynamic diffraction.

Система уравнений (3) может быть решена численными методами. Для этого профиль рельефа разбивается на N элементарных слоёв (рис. 2), нумерация слоёв производится снизу вверх. Для каждого элементарного слоя функция $U_m(z)$ принимает постоянное значение $U_m(\bar{z}_n)$, где $\bar{z}_n = (z_n + z_{n+1})/2$ – координата середины n -го слоя, z_n и z_{n+1} – координаты верхней и нижней границ n -го слоя. По рекуррентной формуле, начиная с нижнего слоя кристалла, амплитудный коэффициент

отражения (АКО) которого равен $R_m^{(0)}$, последовательно вычисляется АКО по толщине рельефа с учётом добавления верхних элементарных слоёв для каждого дифракционного порядка:

$$R_n^{(m)} = \frac{r_n^{(n)} + (t_n^{(m)} \bar{t}_n^{(m)} - r_n^{(m)} \bar{r}_n^{(m)}) R_{n-1}^{(m)}}{1 - \bar{r}_n^{(m)} R_{n-1}^{(m)}}, \quad (5)$$

где $t_n^{(m)} = \psi e^{i(a_0 U_0(\bar{z}_n) - \sigma) l_n} / D_t$ и $\bar{t}_n^{(m)} = \psi e^{-i(a_0 U_0(\bar{z}_n) - \sigma) l_n} / D_t$ – амплитудные коэффициенты пропускания слоя с номером n в направлении прохождения и дифракции, $r_n^{(m)} = -a_h U_m(\bar{z}_n) / D_r$, $\bar{r}_n^{(m)} = -a_{\bar{h}} U_{-m}(\bar{z}_n) / D_r$ – амплитудные коэффициенты отражения для n -го слоя в направлении дифракции и прохождения, соответственно, $l_n = z_n - z_{n-1}$ – толщина n -го слоя, $D_t = \psi \cos(\psi l_n) - i\sigma \sin(\psi l_n)$, $D_r = \sigma + i\psi \cot(\psi l_n)$, $\sigma = (q_z + a U_0(\bar{z}_n)) / 2$, $\psi = \sqrt{\sigma^2 - a_h a_{\bar{h}} U_m(\bar{z}_n) U_{-m}(\bar{z}_n)}$, $a = a_0 + a_{\bar{0}}$. Фурье амплитуда отражённой волны от кристалла с рельефом равна

$$\tilde{E}_h(k_\Lambda m, 0) = R_N^{(m)} \tilde{E}_0(0, 0), \quad (6)$$

где $\tilde{E}_0(0, 0)$ – амплитуда падающей волны в Фурье пространстве. Динамическое отражение от кристалла без рельефа имеет следующее решение:

$$R_0^{(m)} = -\frac{a_h}{\sigma + i\psi \cot(\psi l_z)} \delta_m. \quad (7)$$

Здесь

$$\delta_m = \begin{cases} 1, & m = 0, \\ 0, & m \neq 0, \end{cases} \quad \psi = \sqrt{\sigma^2 - a_h a_{\bar{h}}}.$$

Для модели полубесконечной кристаллической подложки ($L_z \rightarrow \infty$) решение (7) трансформируется к виду $R_0^{(m)} = -a_h \delta_m / (\sigma + \psi \operatorname{sign}(\operatorname{Im} \psi))$.

Из решения (7) следует, что дифракция рентгеновских лучей в подложке сказывается только на отражение в нулевой дифракционный порядок, а на сателлитную структуру остальных порядков не оказывает никакого влияния.

Запишем выражение для интенсивности отражённой волны применительно к трёхосевой схеме дифракции

$$I_h^{(m)} = \frac{1}{b} |R_N^{(m)}|^2 I_0, \quad (8)$$

где I_0 – интенсивность падающей волны, $b = \gamma_0 / \gamma_h$ – фактор асимметрии.

2. Кинематическое приближение. Аналитические решения

В кинематическом приближении в рентгеновской дифракции не учитывается динамическое взаимодействие проходящей и отражённой волны, при этом в системе уравнений (1) можно положить $a_{\bar{h}} = 0$. Это позволяет записать решение уравнений (3) для дифракционного порядка m в следующем виде:

$$R_1^{(m)} = e^{i(q_z + \Gamma a) l_z} R_0^{(m)} + r_1^{(m)}. \quad (9)$$

В рамках кинематического приближения решение дифракционной задачи сводится к вычислению АКО $R_0^{(m)}$ от подложки и поверхностного рельефа $r_1^{(m)}$. Амплитудный коэффициент отражения m -го дифракционного порядка запишется как

$$r_1^{(m)} = i a_h \int_0^{l_z} dz U_m(z) e^{i q_z z + i a l_z v(\zeta)}. \quad (10)$$

Присутствующая в экспоненте (10) функция заполнения равна

$$v(\zeta) = \int_0^{l_z} dz U_0(z). \quad (11)$$

Заметим, что отношение средней ширины штриха к периоду рельефа $\bar{\Gamma} \equiv v(1)$. Функцией заполнения v показывает как меняется доля рассеивающего вещества в объеме штриха с глубиной z .

Общее условие, которое определяет границы применимости кинематического приближения, соответствует:

$$\frac{1}{b} |R_1^{(m)}|^2 \ll 1. \quad (12)$$

Для нулевого порядка дифракции вклад АКО состоит из слабого кинематического отражения от рельефа и сильного динамического отражения от нижней части кристалла (подложки). В угловой области ненулевых дифракционных порядков ($m \neq 0$) отражение от подложки отсутствует, следовательно, можно записать

$$R_1^{(m)} = r_1^{(m)}. \quad (13)$$

В отличие от динамической дифракции, в кинематическом приближении можно получить аналитическое решение задачи для различных моделей штриха.

2.1. Трапецеидальная модель

Трапецеидальная форма штриха является наиболее простой моделью. Вместе с тем эта модель позволяет дополнительно описать рельеф с прямоугольным и треугольным профилем штриха, а также в форме параллелограмма. Трапецеидальная модель характеризуется двумя параметрами. Величина $\bar{\Gamma}$ задаёт отношение средней ширины трапеции \bar{l}_x к периоду Λ . Вторым параметром Γ_Δ определяет профиль штриха (рис. 3а).

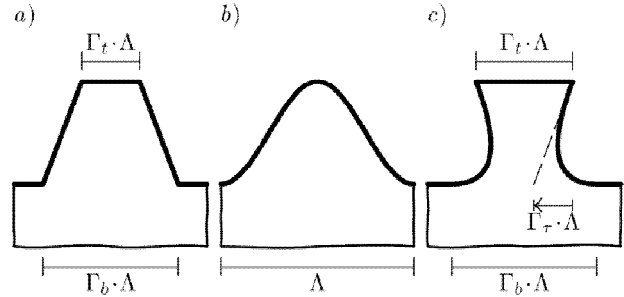


Рис. 3. Модели профилей штрихов трапецеидального (а), синусоидального (б) и параболического (с) рельефа.

Fig. 3. Models of the profiles of strokes of trapezoidal (a), sinusoidal (b) and parabolic (c) relief.

Размеры верхнего и нижнего оснований трапеции связаны соотношениями $\Gamma_t = \bar{\Gamma} (1 - \Gamma_\Delta)$ и $\Gamma_b = \bar{\Gamma} (1 + \Gamma_\Delta)$, соответственно. Если $\Gamma_\Delta = 0$ и коэффициент линейной асимметрии в (4) $\Gamma_a = 0$, то штрихи имеют прямоугольную форму, при $\Gamma_\Delta = 1$ – треугольную, а при $\Gamma_\Delta = -1$ – форму перевернутого треугольника. Параметры трапецеидальной модели должны удовлетворять условиям:

$$0 < \bar{\Gamma} < 1, |\Gamma_\Delta| \leq 1, \bar{\Gamma} (1 \pm \Gamma_\Delta) \leq 1. \quad (14)$$

Для этой модели зависимость ширины штриха от приведённой глубины рельефа ζ следует из

выражения

$$\Gamma(\zeta) = \bar{\Gamma} (1 + \Gamma_{\Delta} (2\zeta - 1)). \quad (15)$$

В случае трапецидальной модели функция $v(\zeta) = \bar{\Gamma} ((1 - \Gamma_{\Delta})\zeta + \Gamma_{\Delta}\zeta^2)$. Аналитическое решение выражения (10) будет иметь вид:

$$r_1^{(m)} = a_h l_z e^{i\varphi} [e^{i\pi m \bar{\Gamma}} f(\varphi + \pi m(\Gamma_a + \Gamma_{\Delta} \bar{\Gamma}), p) - e^{-i\pi m \bar{\Gamma}} f(\varphi + \pi m(\Gamma_a - \Gamma_{\Delta} \bar{\Gamma}), p)] / (2\pi m). \quad (16)$$

Здесь введены безразмерные параметры $\varphi = (q_z + \bar{\Gamma} a) l_z / 2$ и $p = \Gamma_{\Delta} \bar{\Gamma} a l_z$. Присутствующий в (16) интеграл $f(x, p) = \int_0^1 dy e^{ixy + ip(y^2 - 1)/4}$ имеет решение, выраженное с помощью функции Доусона [13]:

$$f(x, p) = \frac{c_1^*}{\sqrt{p}} [e^{ix} F(c_1 \frac{2x+p}{2\sqrt{p}}) - e^{-ix} F(c_1 \frac{2x-p}{2\sqrt{p}})]. \quad (17)$$

Комплексное число $c_1 = (1 + i)/\sqrt{2}$.

Функция $v(\zeta)$ учитывает влияние особенностей формы штриха на процесс дифракции рентгеновских волн от кристаллического рельефа с учётом эффектов преломления и поглощения. Задача существенно упрощается для формы штриха со средней шириной $\bar{\Gamma} \Lambda$ и малым параметром Γ_{Δ} . Тогда функция $v(\zeta) \approx \bar{\Gamma} \zeta$, и выражение (16) примет вид:

$$r_1^{(m)} \approx a_h l_z e^{i\varphi} [e^{i\pi m \bar{\Gamma}} \text{sinc}(\varphi + \pi m(\Gamma_a + \Gamma_{\Delta} \bar{\Gamma})) - e^{-i\pi m \bar{\Gamma}} \text{sinc}(\varphi + \pi m(\Gamma_a - \Gamma_{\Delta} \bar{\Gamma}))] / (2\pi m), \quad (18)$$

где $\text{sinc } x = (\sin x)/x$. Таким образом, решение (18) оправдано при малом значении параметра Γ_{Δ} . Отметим, что решение (18) в другом представлении ранее получено в работе [14].

2.2. Синусоидальная модель

Для синусоидального рельефа (рис. 3б) функциональная зависимость ширины штриха от z имеет вид:

$$\Gamma(\zeta) = \frac{1}{\pi} \arccos(1 - 2\zeta). \quad (19)$$

Тогда функция (11) запишется как

$$v(\zeta) = \frac{1}{\pi} \sqrt{\zeta - \zeta^2} + \frac{2\zeta - 1}{2\pi} \arccos(1 - 2\zeta). \quad (20)$$

Поскольку (20) имеет сложный вид, поэтому интеграл (10) для синусоидального рельефа не приводится к аналитическому выражению и решение дифракционной задачи вычисляется численными методами.

Средняя ширина штриха для синусоидальной модели равна $\bar{\Gamma} = 1/2$. Если воспользоваться приближением функции $v(\zeta) \approx \zeta/2$, то для синусоидальной модели можно получить аналитическое решение АКО

$$r_1^{(m)} \approx i a_1 T e^{i\varphi} g(m, \varphi + \pi m \Gamma_a), \quad (21)$$

где $\varphi = (q_z + a/2) l_z / 2$, $g(m, x) = i(-i)^m J_m(x)/x$, $J_m(x)$ – функция Бесселя первого рода. Отметим, что в устранимых особых точках функция $g(\pm 1, 0) = \pm 1/4$, $g(\pm 2, 0) = 0$, $g(\pm 3, 0) = 0$ и т.д. Последнее означает факт расщепления спутных пиков с дифракционными порядками $|m| \geq 2$. Похожее по структуре решение получено при исследовании дифракции в кристалле, промодулированного поверхностной акустической волной [15].

Модель трапецидального профиля штриха (16) может быть использована как приближение для кристалла с синусоидальным рельефом, применяя принцип оптимальной подгонки. Пусть синусоидальная модель определена функцией $\Gamma_1(\zeta)$, а трапецидальная – $\Gamma_2(\zeta)$. Полагая равной среднюю ширину штрихов обеих моделей $\bar{\Gamma}_1 = \bar{\Gamma}_2$ (в нашем случае $\bar{\Gamma}_1 = 1/2$), подберём такое значение параметра Γ_{Δ} , чтобы минимизировать разницу $\Gamma_1(\zeta) - \Gamma_2(\zeta)$ по всей глубине рельефа. Таким образом получаем для синусоидальной модели $\Gamma_{\Delta} = 3/4$. Сравнение решений обеих моделей будет дано ниже.

2.3. Параболическая модель

Интересной с практической точки зрения является параболическая модель штриха, показанная на рис. 3с. На рис. 4б и с представлены варианты этой модели, которые могут адекватно описывать экспериментальные измерения [6, 12].

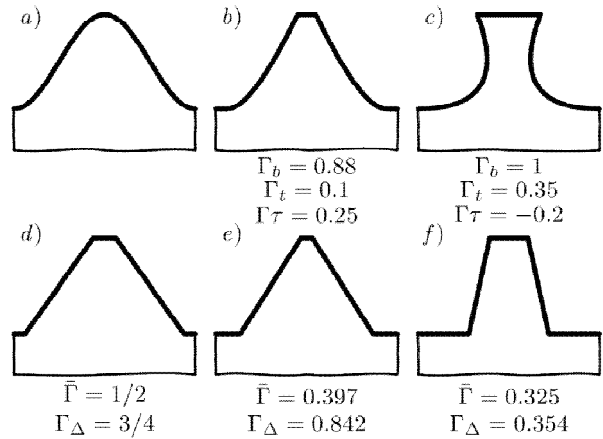


Рис. 4. Расчетные профили штрихов синусоидальной (а) и параболической (b и c) моделей и соответствующие им оптимальные подгонки трапецидальной моделью (d - f).

Fig. 4. The calculated profiles of strokes of sinusoidal (a) and parabolic (b and c) models and corresponding optimal fit by trapezoidal model (d - f).

Отметим, что параболическая модель штриха впервые предложена в данной работе. В основе модели лежит идея описания стенки штриха полиномами второй степени. Следующие параметрические уравнения описывают правую стенку штриха параболического рельефа:

$$\left. \begin{aligned} x(t) &= \frac{l_t}{2} + 2l_{\tau} t + (l_b - l_t - 4l_{\tau}) \frac{t^2}{2}, \\ z(t) &= l_z (2t - t^2). \end{aligned} \right\} \quad (22)$$

Переменная t принимает численные значения на отрезке $[0; 1]$. Латеральные параметры штриха $l_t = \Gamma_t \Lambda$, $l_b = \Gamma_b \Lambda$ и $l_{\tau} = \Gamma_{\tau} \Lambda$ представлены на рис. 3с. Следовательно, параболическая модель описывается тремя параметрами – Γ_b , Γ_t и Γ_{τ} . Исключая из (22) параметр t и принимая ширину штриха равной $l_x(z) = 2x(z)$, получаем

$$\Gamma(\zeta) = p_1 + p_2 \zeta + p_3 \sqrt{1 - \zeta}. \quad (23)$$

Здесь присутствуют безразмерные параметры

$$\left. \begin{aligned} p_1 &= 2\Gamma_b - \Gamma_t - 4\Gamma_{\tau}, \\ p_2 &= \Gamma_t - \Gamma_b + 4\Gamma_{\tau}, \\ p_3 &= 2(\Gamma_t - \Gamma_b + 2\Gamma_{\tau}). \end{aligned} \right\} \quad (24)$$

Средняя ширина штриха параболической модели равна

$$\bar{\Gamma} = p_1 + \frac{1}{2}p_2 + \frac{2}{3}p_3. \quad (25)$$

Оптимальная подгонка параболического профиля трапецеидальной моделью возможна с использованием параметра

$$\Gamma_{\Delta} = \frac{15p_2 - 12p_3}{30p_1 + 15p_2 + 20p_3}. \quad (26)$$

При этом заметим, что трапецеидальная модель с параметрами (25) и (26) будет правильной до тех пор, пока выполняются условия (9).

Можно проверить правильность выбранных параметров параболической модели, используя следующие условия: $0 \leq \Gamma_b \leq 1$, $0 \leq \Gamma_t \leq 1$, $0 < \bar{\Gamma} < 1$, $0 \leq \Gamma(\zeta_e) \leq 1$ при $0 \leq \zeta_e \leq 1$, где $\zeta_e = 1 - (p_3/(2p_2))^2$.

Для параболического рельефа функция $v(\zeta)$ имеет достаточно сложный вид:

$$v(\zeta) = p_1\zeta + \frac{p_2}{2}\zeta^2 - \frac{2p_3}{3}\left((\sqrt{1-\zeta})^3 - 1\right). \quad (27)$$

Поскольку выражение (10) не имеет аналитического решения, угловое распределение интенсивности рассеяния вычисляется численными методами. АКО для параболической модели можно получить в аналитическом виде, если воспользоваться приближением функции $v(\zeta) \approx \bar{\Gamma}\zeta$:

$$r_1^{(m)} \approx a_h l_z e^{i\varphi} \left[e^{i\pi m \bar{\Gamma}} h(\varphi + \pi m(\Gamma_a + \Gamma_{\Delta} \bar{\Gamma}), p) - e^{-i\pi m \bar{\Gamma}} h(\varphi + \pi m(\Gamma_a - \Gamma_{\Delta} \bar{\Gamma}), -p) \right] / (2\pi m). \quad (28)$$

Здесь введены параметры $\varphi = (q_z + \bar{\Gamma}a)l_z/2$ и $p = 2\pi m p_3$. Функция $h(x, p)$ в (28) имеет следующий вид:

$$h(x, p) = \frac{e^{-ip/6}}{x_2} \left(\sin x_1 + \frac{c_2^* p}{\sqrt{x_2}} \left[e^{ix_1 F\left(\frac{c_2 p}{\sqrt{x_2}}\right)} + e^{-ix_1 F\left(\frac{c_2(4x+3p/5)}{\sqrt{x_2}}\right)} \right] \right), \quad (29)$$

где $c_2 = (i-1)/4$, $x_1 = x - \frac{1}{10}p$, $x_2 = x + \frac{2}{5}p$. Заметим, что в рамках приближения $v(\zeta) \approx \bar{\Gamma}\zeta$ решения (16) и (28) по своей структуре совпадают.

3. Численное моделирование

Численное моделирование углового распределения интенсивности рассеяния на кристалле с рельефом выполнено для кристалла кремния. Выбрано симметричное отражение (111) σ -поляризованного рентгеновского излучения с $\lambda = 0.154$ нм. Результаты численного моделирования представлены на рис. 5–10.

Трапецеидальная модель профиля штриха уже анализировалась в ряде работ. Поэтому в настоящей статье основное внимание уделено синусоидальной и параболической моделям. Конкретные варианты анализируемых моделей представлены на рис. 4а-с. На рис. 4d-f показаны соответствующие оптимальные подгонки трапецеидальной моделью.

На рис. 5–7 представлены карты интенсивности рассеяния в обратном пространстве (Reciprocal space mapping, RSM) вблизи узла (111) обратной решётки кристалла кремния с рельефом. Пиктограммы на картах и q_z -сечениях поясняют выбор

модели штриха, используемой в расчётах. Высота поверхностного рельефа составила 3 мкм, период поверхностной решётки – 2 мкм. Расчёты проводились по динамической теории на основе решения (5). Распределение отражённой плоской рентгеновской волны в обратном пространстве от латерально неограниченной дифракционной решётки представляет собой вдоль оси q_x набор периодически расположенных бесконечно тонких линий (рис. 5). Расстояние между линиями равно $2\pi/\Lambda$. На рисунке обозначены номера порядков дифракции от кристаллического рельефа.

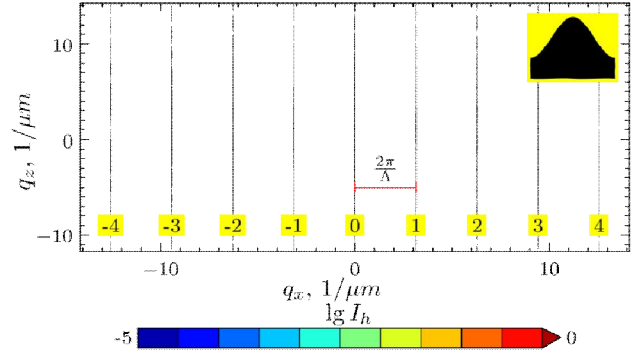


Рис. 5. RSM на кристалле с синусоидальным рельефом для плоской волны без учёта инструментальной функции. Дифракционные порядки представляют собой δ -функцию в латеральном направлении.
Fig. 5. RSM on the crystal with a sinusoidal relief for plane wave without the instrumental function. Diffraction orders represent the δ -function in the lateral direction.

Визуализация расчётной дифракционной картины вблизи узла обратной решётки Si(111) возможна с учётом инструментальной функции [16]. Для вычисления RSM с учётом аппаратных искажений использовалось четырёхкратное отражение от кристалла монохроматора Ge(220) и трёхкратное отражение от кристалла анализатора Ge(220). На рис. 6, 7 представлены RSM, вычисленные с помощью инструментальной функции. Чувствительность рентгеновской дифракции к профилю штриха показана на рис. 6. На рис. 6а можно заметить, что максимумы дифракционных порядков локализируются по q_z вдоль двух линий. Тангенс угла наклона первой линии равен $\Gamma_{\Delta}\bar{\Gamma}/l_z$, второй – $(-\Gamma_{\Delta}\bar{\Gamma})/l_z$, где для синусоидального рельефа $\bar{\Gamma} = 0.5$, $\Gamma_{\Delta} = 0.75$. Если в сечении профиля штриха наблюдается линейная асимметрия, то форма максимумов не меняется, но их положения по оси q_z смещаются. На рис. 7 представлена RSM для синусоидального рельефа с коэффициентом линейной асимметрии $\Gamma_a = 0.25$. Здесь тангенс угла наклона первой линии равен $(\Gamma_{\Delta}\bar{\Gamma} - \Gamma_a) \cdot \Lambda/l_z$, второй линии – $(-\Gamma_{\Delta}\bar{\Gamma} - \Gamma_a) \cdot \Lambda/l_z$. Таким образом, параметр Γ_a влияет на угол наклона этих линий. Подобный вывод можно сделать относительно других моделей штриха.

На рис. 8 представлены q_z -сечения четвертого дифракционного порядка без учёта (кривая 1) и с учётом (кривая 2) инструментальной функции для различных моделей рельефа. Можно заметить, что для толстого рельефа (3 мкм) разрешающая способность инструментальной функции не достаточ-

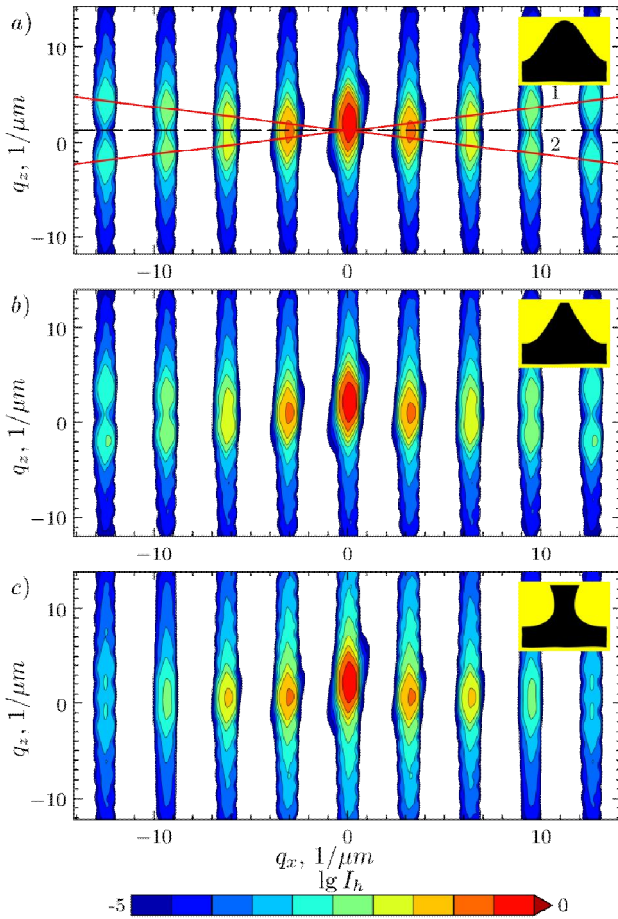


Рис. 6. RSM на кристалле с синусоидальным (a) и параболическим (b, c) рельефом с учётом инструментальной функции.

Fig. 6. RSM on the crystal with sinusoidal (a) and parabolic (b, c) relief, taking into account the instrumental function.

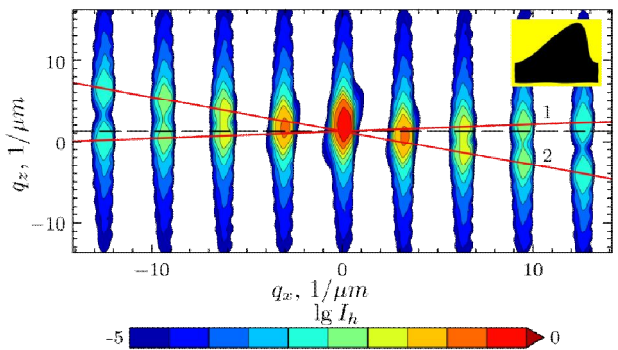


Рис. 7. RSM на кристалле с синусоидальным асимметричным рельефом с учётом инструментальной функции.

Fig. 7. RSM on the crystal with asymmetric sinusoidal relief taking into account the instrumental function.

на. Однако для RSM (с высотой кристаллического рельефа 1 мкм) аппаратные искажения приемлемы. Несмотря на то, что глубина экстинкции отражения от кристалла Si(111) равна $l_{ext} = 1.5$ мкм, а толщина рельефа l_z вдвое превышает глубину экстинкции l_{ext} , спутанная структура отражённой вол-

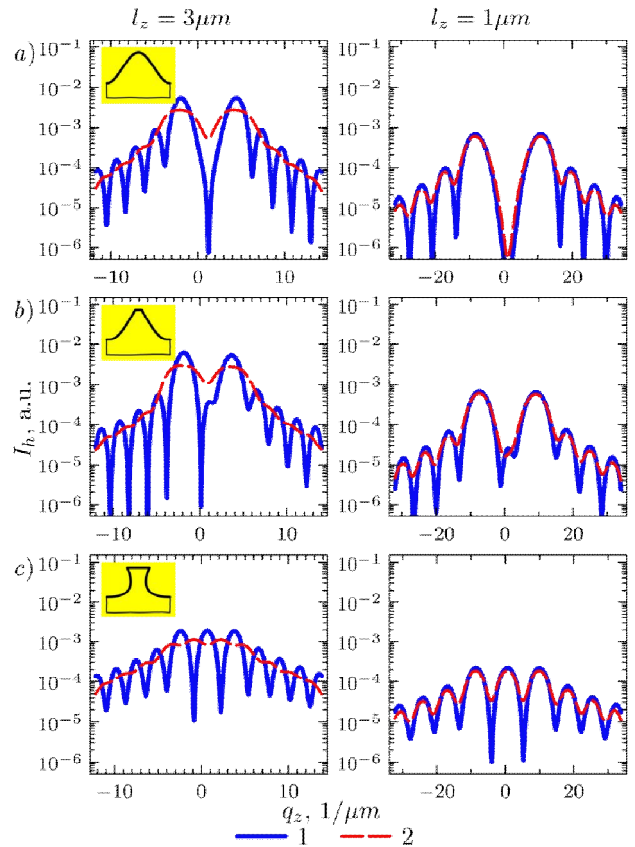


Рис. 8. Кривые q_z -сечений 4-го дифракционного порядка для кристалла с различными моделями рельефа и высоты l_z без учёта (кривая 1) и с учётом (кривая 2) инструментальной функции.

Fig. 8. Curves of q_z -sections of the 4-th diffraction order for the crystal with various models of relief and the height l_z without taking into account (curve 1) and with it (curve 2) of the instrumental function.

ны ненулевых дифракционных порядков удовлетворяет условию кинематического приближения (12). Это связано с латеральным размером рельефного штриха [17,18].

Рис. 9 позволяет оценить качество приближённых аналитических решений (21) и (28) для синусоидальной и параболической модели штриха соответственно. Кривые q_z -сечений первого и четвертого дифракционных порядков представлены в прямом масштабе. Кривые 1 соответствуют точному решению кинематического приближения, кривые 2 – соответствующим аналитическим решениям. Инструментальная функция в расчётах не учитывалась. Кривые 1, полученные интегрированием (10), на q_z -сечениях b и c имеют асимметричный вид, в то время как результат аналитического решения даёт симметричный профиль (кривая 2). Асимметрия кривой вызвана эффектом преломления рентгеновских лучей на поверхностном рельефе, у которого абсолютное значение параметра Γ_Δ существенно отличается от нуля. При этом асимметрия кривой возрастает с ростом толщины штрихов рельефа. Следовательно, аналитические решения (18) и (28), полученные путём упрощения функции заполнения $v(\zeta) \approx \bar{\Gamma}\zeta$, справедливы для тонкого рельефа с небольшим значением коэффициента Γ_Δ . Заметим исключение: синусоидальный

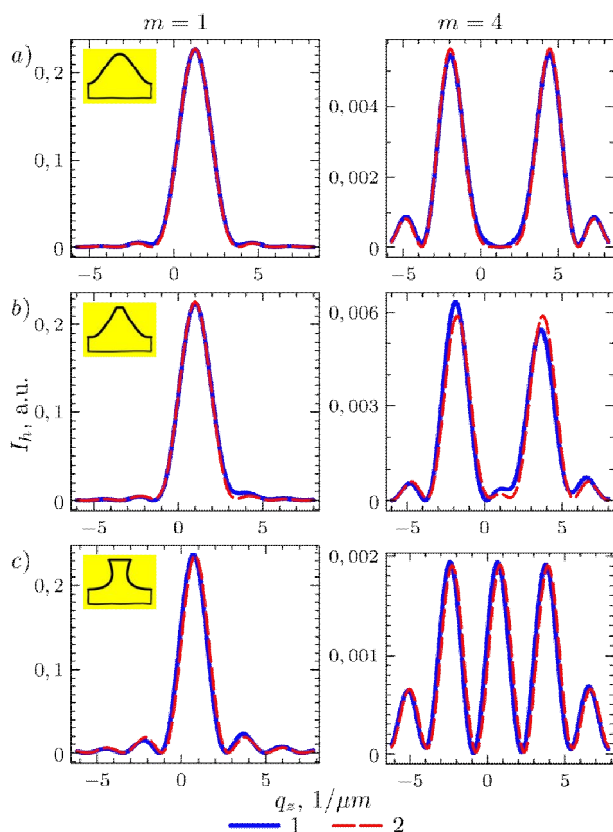


Рис. 9. Кривые q_z -сечений 1-го и 4-го дифракционных порядков на кристалле с синусоидальным (a) и параболическим (b и c) рельефом, полученные численным интегрированием (кривые 1) и аналитически (кривые 2).

Fig. 9. Curves of q_z -sections of the 1st and 4th diffraction orders on the crystal with sinusoidal (a) and parabolic (b and c) relief obtained by numerical integration (curves 1) and analytically (curves 2).

рельеф имеет $\Gamma_{\Delta} = 3/4$, но асимметрия кривых отражения ненулевых дифракционных порядков не наблюдается (рис. 6a).

Важным аспектом данной работы является оптимальная подгонка трапецеидальной модели штриха к другим моделям. На рис. 4a-с показаны модели рельефа, а под ними – их оптимальные аналоги трапецеидального рельефа с указанием значений параметров. На рис. 10 представлены КДО (без учёта инструментальной функции) первого и четвёртого дифракционного порядка соответствующих моделей штриха. Заметные отличия в q_z -сечениях между исходной моделью и трапецеидальной наблюдаются с порядков $|m| \geq 2$. То есть детали профиля сильно сказываются на формировании дальних дифракционных порядков. Поэтому в расчётах для объяснения эксперимента в работе [12] желательно учитывать особенности профиля штриха. Трапецеидальная модель является хорошим первоначальным приближением для задачи реконструкции рельефа по ближним дифракционным порядкам, так как содержит только два неизвестных параметра – $\bar{\Gamma}$ и Γ_{Δ} . Используя эти первоначальные данные, можно далее уточнять детали профиля штриха.

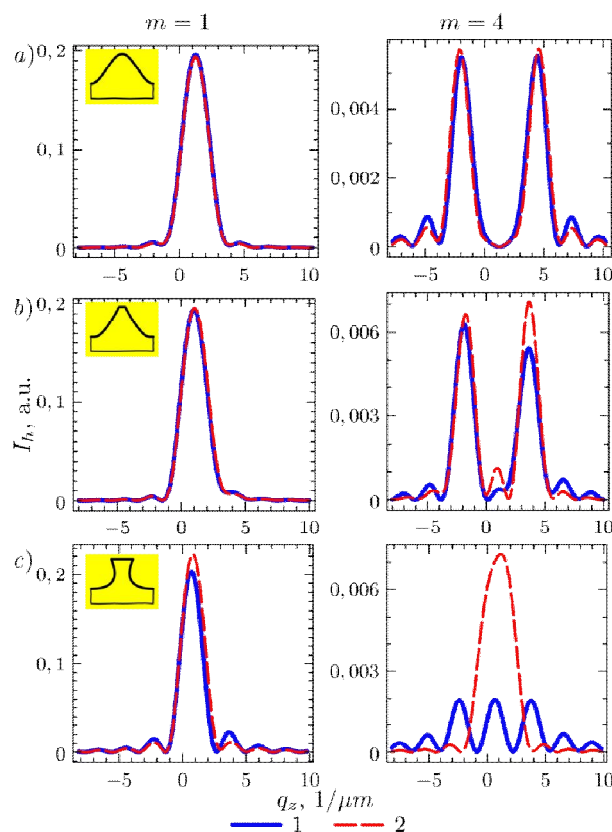


Рис. 10. Кривые q_z -сечений 1-го и 4-го дифракционных порядков на кристалле с синусоидальным (a) и параболическим (b и c) рельефом. Кривые 1 соответствуют исходному профилю, кривые 2 – оптимальной подгонке трапецеидальной моделью.

Fig. 10. Curves of q_z -sections of the 1st and 4th diffraction orders on the crystal with sinusoidal (a) and parabolic (b and c) relief. Curves 1 correspond to the initial profile, curves 2 – the optimal fit by trapezoidal model.

Заключение

Предложены модели профиля штриха кристаллического рельефа и решения задачи дифракции рентгеновской волны в кинематическом приближении. Описанный подход будет полезен для задачи реконструкции профиля штриха по данным высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии [19]. Использование кинематического приближения существенно сокращает вычислительный объём задачи. Представленные выводы могут быть востребованными в рентгеновской и нейтронной оптике.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке гранта РФФИ (проекты №17-02-00090А, №16-43-110350ра) и комплексной программы фундаментальных исследований УрО РАН (проект №18-10-2-23).

Литература

1. Bac S., Soulli G., Mirone A., Idir M. et al. // Opt. Commun., 1997. 144. P.281–291.
2. Baumbach T., Lybbert D., Gailhanou M. // J. Appl. Phys., 2000. 87. P.3744–3748.
3. Aristov V.V., Erko A.I., Nikulin A.Yu., Snigi-

- rev A.A. // Opt. Commun., 1986. Vol.58. I.5. P.300–302.
4. Aristov V.V., Nikulin A.Yu., Snigirev A.A., Zaumseil P. // Phys. Stat. Sol., 1986. A95. P.81–86.
 5. Macrander T., Slusky S.E.G. // Appl. Phys. Lett., 1990. 56. P.443–445.
 6. Tapfer L., Grambow P. // Appl. Phys. A: Solids Surf., 1990. A50. P.3–6.
 7. Tolan M., Press W., Brinkop F., Kotthaus J.P. // J. Appl. Phys., 1994. 75 (12). P.7761–7769.
 8. De Caro L., Sciacovelli P., Tapfer L. // Appl. Phys. Lett., 1994. Vol.64. N.1. P.34–36.
 9. Geue T., Henneberg O., Pietsch U. // Cryst. Res. Technol., 2002. Vol.37. N.7. P.770–776.
 10. Takagi S. // J. Phys. Soc. Japan., 1969. Vol. 27. P.1239–1253.
 11. Kozhevnikov I.V., van der Meer R., Bastiaens H.M.J., Boller K.-J., Bijkerk F. // Optics Express, 2010. Vol.18. N.15. P.16234–16242.
 12. André J.-M., Guen K., Jonnard P. // X-Ray Spectrom., 2014. 43. P.122–125.
 13. Abromowitz M., Stegun I.A. Handbook of mathematical functions. National Bureau of Standards, 1972. 1060p.
 14. Пунегов В.И. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2002. №1. С.77–81.
 15. Пунегов В.И. // Письма в ЖТФ, 2003. Т.29. Вып.19. С.52–59.
 16. Gartstein E., Mandelbrot M., Mogilyanski D. // J. Phys. D: Appl. Phys., 2001. Vol.34. A57–A63.
 17. Punegov V.I., Kolosov S.I., Pavlov K.M. // Acta Cryst., 2014. Vol. A70. N. 1. P. 64–71.
 18. Punegov V.I., Kolosov S.I., Pavlov K.M. // J. Appl. Cryst., 2016, Vol. 49. P. 1190–1202.
 19. Soltwisch V., Fernandez Herrero A., Pflüger M., Haase A., Probst J., Laubis C., Krumrey M., Scholze F. // arXiv:1704.08032v3, 2017.
 3. Aristov V.V., Erko A.I., Nikulin A.Yu., Snigirev A.A. // Opt. Commun., 1986. Vol.58. I.5. P.300–302.
 4. Aristov V.V., Nikulin A.Yu., Snigirev A.A., Zaumseil P. // Phys. Stat. Sol., 1986. A95. P.81–86.
 5. Macrander T., Slusky S.E.G. // Appl. Phys. Lett., 1990. 56. P.443–445.
 6. Tapfer L., Grambow P. // Appl. Phys. A: Solids Surf., 1990. A50. P.3–6.
 7. Tolan M., Press W., Brinkop F., Kotthaus J.P. // J. Appl. Phys., 1994. 75 (12). P.7761–7769.
 8. De Caro L., Sciacovelli P., Tapfer L. // Appl. Phys. Lett., 1994. Vol.64. N.1. P.34–36.
 9. Geue T., Henneberg O., Pietsch U. // Cryst. Res. Technol., 2002. Vol.37. N.7. P.770–776.
 10. Takagi S. // J. Phys. Soc. Japan., 1969. Vol. 27. P.1239–1253.
 11. Kozhevnikov I.V., van der Meer R., Bastiaens H.M.J., Boller K.-J., Bijkerk F. // Optics Express, 2010. Vol.18. N.15. P.16234–16242.
 12. André J.-M., Guen K., Jonnard P. // X-Ray Spectrom., 2014. 43. P.122–125.
 13. Abromowitz M., Stegun I.A. Handbook of mathematical functions. National Bureau of Standards, 1972. 1060p.
 14. Punegov V.I. Poverhnost'. Rentgenovskie, sinchrotronnye i nejtronnye issledovanija [Surface. X-ray, synchrotron and neutron studies]. J. Surf. Invest.: X-Ray, Synchrotron Neutron Tech., 2002. N.1. P.77–81.
 15. Punegov V.I. // Pis'ma v ZhTF [Technical Physics Letters], 2003. Vol.29. Issue 19. P.52–59.
 16. Gartstein E., Mandelbrot M., Mogilyanski D. // J. Phys. D: Appl. Phys., 2001. Vol.34. A57–A63.
 17. Punegov V.I., Kolosov S.I., Pavlov K.M. // Acta Cryst., 2014. Vol. A70. N. 1. P. 64–71.
 18. Punegov V.I., Kolosov S.I., Pavlov K.M. // J. Appl. Cryst., 2016, Vol. 49. P. 1190–1202.
 19. Soltwisch V., Fernandez Herrero A., Pflüger M., Haase A. et al. // arXiv:1704.08032v3, 2017.

References

Статья поступила в редакцию 26.12.2017.